

трения с поверхностью твэл и, трения с газовым потоком. Поэтому важным является понимание того, какой эффект будет иметь преобладающее воздействие и в какую сторону будет двигаться плёнка расплава.

В представленной работе исследуется поведение расплавленной в результате аварии оболочки твэл реактора на быстрых нейтронах с учётом различных внешних условий: под действием силы тяжести, трения плёнки расплава с газовым потоком и одновременном действии указанных сил. Для проведения численных расчётов использовался модуль SAFR интегрального кода ЕВКЛИД/V2[1], разработанный в ИБРАЭ РАН.

Численное решение анализировалось при различных расчётных параметрах, таких как шаг интегрирования, масштаб расчётной сетки и др. Результаты сравнивались с аналитическим решением рассматриваемой физической модели. В результате анализа, было выяснено, что средняя абсолютная погрешность численного метода, в сравнении с аналитическим решением, не превышает 5% при любых допустимых параметрах расчета.

Для проведения вышеописанных расчётов была проведена интеграция метода, позволяющего правильно рассчитывать перенос массы и энергии между расчётными ячейками. А именно, доработана возможность переноса массы и энергии большей, чем есть на текущий временной момент в ячейке, за счёт добавления свободного члена, уравнивающего правую часть уравнения.

Внедрение этого метода позволило проводить численные расчёты с использованием модуля в условиях приблизительно равных по силе воздействия силы гравитации и одновременного трения поверхности плёнки с газовым потоком.

Список публикаций:

[1] Алипченков В.М., Беликов В.В., Васекин В.Н., Вепрев Д.П., Веретенцев В.А., Иванов Е.Н., Колобаева П.В., Кудашов И.Г., Мосунова Н.А., Стаханова А.А., Стрижов В.Ф., Усов Э.В., Муратов А.Г., Тюков В.В., Анфимов А.М., Горбунов В.С., Кузнецов Д.В. // *Материалы Третьей международной научно-технической конференций. «Инновационные проекты и технологии ядерной энергетики» Москва, 07-10 октября 2014; Изд-во ОАО "НИКИЭТ". 2014. С.175-191.*

Автоматизация системы детектирования подвижности лабораторных мышей в биологических экспериментах

Перетьяко Александр Павлович

Новосибирский государственный университет

Рудаков Аркадий Владимирович

alex_p94@mail.ru

В ряде биологических экспериментов над лабораторными мышами ученым требуется знать, насколько подвижными были их подопытные. В настоящее время существуют системы мониторинга двигательной активности лабораторных мышей на основе систем видеонаблюдения. Специализированная обработка изображения получаемого с видеокамеры позволяет измерять уровень активности мыши и классифицировать её движение. Однако этот подход достаточно ресурсоемкий. Во многих экспериментах может одновременно участвовать (в различных клетках) несколько десятков подопытных мышей, а масштабирование системы видеонаблюдения оказывается экономически не приемлемым. При этом зачастую не требуется дифференциация типов движения и разрешение мелкой моторики, а достаточно лишь фиксировать перемещение мыши в пределах клетки.

Для решения данной задачи был выбран способ измерения количества движения при помощи пассивной инфракрасной матрицы малого разрешения. Пассивная инфракрасная матрица имеет достаточную разрешающую способность для фиксации небольших температурных изменений. Данный способ позволяет однозначно детектировать факт движения мыши. А также, исходя из распределения интенсивности инфракрасного излучения и перемещения его пиков, оценивать количество движения подопытной мыши. В ходе работы был разработан специализированный алгоритм, позволяющий на основе анализа накопленных данных построить траекторию движения подопытной мыши за произвольный временной промежуток.

Для работы была выбрана пассивная инфракрасная матрица AMG8833 производства фирмы Panasonic [1]. На ее основе построен датчик, включающий в себя микроконтроллер, который осуществляет получение данных с пассивной инфракрасной матрицы по интерфейсу I2C, первичную обработку данных и дальнейшую передачу информации на верхний уровень посредством интерфейса RS-485 по протоколу Modbus RTU. Целью настоящей работы являлась разработка соответствующего программного обеспечения для микроконтроллера. Управляющее приложение на верхнем уровне осуществляет опрос необходимого числа датчиков, обработку, накопление и визуализацию полученных данных.

В настоящее время собран макет системы, включающий в себя прототип датчика и программное обеспечение верхнего уровня, реализующее базовый функционал. В ходе тестирования работы прототипа системы было определено, что при использовании данного метода достигается необходимая точность измерения количества движения. Следующим шагом необходимо отладить функционирование программного обеспечения верхнего уровня при подключении порядка нескольких десятков датчиков. В дальнейшем планируется провести тестирование системы с целью оценить возможность детектирования посещений кормушки и поилки лабораторной мышью, а также возможность детектирования выделений мыши.

Список литературы:

[1] AMG88xx Grid-EYE Datasheet.

Разработка универсальной программы, позволяющей изучать строение молекул и оценивать центры специфической сольватации

Халявка Мария Анатольевна

Кубанский государственный университет

Жаркова Оксана Михайловна

mari.khalyavka@mail.ru

В настоящее время происходят коренные изменения в сфере высоких технологий – информационных технологиях, микромеханике и др., связанные с фундаментальными и прикладными исследованиями, конструированием и практическим использованием материалов и устройств, элементы которых имеют размеры менее 100 нанометров.

Чтобы создать любой нанообъект необходимо детальное знание его структуры. А знание структуры, в свою очередь, в виду малости объектов, возможно с помощью методов компьютерного моделирования. Под знанием структуры понимается геометрическая конфигурация, соответствующая глобальному минимуму энергии. Кроме того, необходимо учесть динамическое поведение молекулы и влияние межмолекулярных взаимодействий. В настоящее время существуют программные продукты, позволяющие произвести подобные вычисления в рамках неэмпирических и полумэмпирических методов, однако, нет программы, которая бы единым образом объединяла расчет структуры молекулы и влияние межмолекулярных взаимодействий.

В связи с этим, целью данной работы является создание программы, которая позволила бы единым образом:

- оптимизировать структуру молекулы;
- исследовать динамическое поведение объекта;
- произвести учет неспецифической сольватации;
- оценить центры специфической сольватации.

Для решения задачи об оптимизации геометрической структуры молекул используется метод молекулярной механики [1], для учета центров специфической сольватации будет использован метод молекулярного электростатического потенциала [2].

В методе молекулярной механики атомы рассматриваются как ньютоновские частицы, которые взаимодействуют друг с другом посредством неких потенциальных полей, задаваемых эмпирически. Потенциальная энергия взаимодействия зависит от длины связей, углов связи, торсионных углов и нековалентных взаимодействий (в т.ч. сил Ван-дер-Ваальса, электростатических взаимодействий и водородных связей). В этих расчетах силы, действующие на атомы, представляются в виде функций координат атомов.

Метод МД основан на численном решении классических уравнений движения частиц в некотором выделенном объеме среды. Все частицы, находящиеся в выделенном объеме (МД ячейке), взаимодействуют друг с другом посредством заданного потенциала взаимодействия.

Информативным является метод молекулярного электростатического потенциала (МЭСП). Его физический смысл следующий. Пусть заряд q_1 создает в точке пространства с радиус-вектором \mathbf{r} МЭСП $V(\mathbf{r})$. Если в эту точку поместить точечный заряд q , то энергия электростатического взаимодействия между зарядом q и зарядом q_1 будет равна qV (в одноэлектронном приближении без учета поляризационной составляющей). В каждой точке \mathbf{r} пространства внутри и вне молекулы МЭСП имеет вид: